```
data_lach12b

_audit_creation_method            SHELXL-97
_chemical_name_systematic
;
 ?
;
_chemical_name_common             (NBu4)3Na[SiW9O34(C2H3PO)2]
_chemical_melting_point           ?
_chemical_formula_moiety          ?
_chemical_formula_sum
 'C117 H257 N9 Na2 O78 P6 Si2 W18'
_chemical_formula_weight          6635.60

loop_
 _atom_type_symbol
 _atom_type_description
 _atom_type_scat_dispersion_real
 _atom_type_scat_dispersion_imag
 _atom_type_scat_source
 'C'  'C'   0.0181   0.0091
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'H'  'H'   0.0000   0.0000
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'N'  'N'   0.0311   0.0180
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'O'  'O'   0.0492   0.0322
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Na'  'Na'   0.1353   0.1239
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'Si'  'Si'   0.2541   0.3302
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'P'  'P'   0.2955   0.4335
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'
 'W'  'W'  -5.4734   5.5774
 'International Tables Vol C Tables 4.2.6.8 and 6.1.1.4'

_symmetry_cell_setting            Monoclinic
_symmetry_space_group_name_H-M    P21/n
_symmetry_space_group_name_Hall   -P2yn

loop_
 _symmetry_equiv_pos_as_xyz
 'x, y, z'
 '-x+1/2, y+1/2, -z+1/2'
 '-x, -y, -z'
 'x-1/2, -y-1/2, z-1/2'

_cell_length_a                    18.7349(7)
_cell_length_b                    41.2914(18)
_cell_length_c                    28.3336(12)
_cell_angle_alpha                 90.00
_cell_angle_beta                  115.473(3)
_cell_angle_gamma                 90.00
_cell_volume                      19787.8(14)
_cell_formula_units_Z             4
_cell_measurement_temperature     200(2)
_cell_measurement_reflns_used     14676
_cell_measurement_theta_min       2.0
_cell_measurement_theta_max       66.8

_exptl_crystal_description        plate
_exptl_crystal_colour             colourless
_exptl_crystal_size_max           0.20
_exptl_crystal_size_mid           0.10
```

```
_exptl_crystal_size_min           0.05
_exptl_crystal_density_meas       ?
_exptl_crystal_density_diffrn     2.227
_exptl_crystal_density_method     'not measured'
_exptl_crystal_F_000              12472
_exptl_absorpt_coefficient_mu     20.030
_exptl_absorpt_correction_type    empirical
_exptl_absorpt_correction_T_min   0.1082
_exptl_absorpt_correction_T_max   0.4342
_exptl_absorpt_process_details    sadabs

_exptl_special_details
;
 ?
;

_diffrn_ambient_temperature       200(2)
_diffrn_radiation_wavelength      1.54178
_diffrn_radiation_type            CuK\a
_diffrn_radiation_source          'fine-focus sealed tube'
_diffrn_radiation_monochromator   graphite
_diffrn_measurement_device_type   'Bruker Smart 6000 CCD'
_diffrn_measurement_method        'CCD scans'
_diffrn_detector_area_resol_mean  ?
_diffrn_standards_number          ?
_diffrn_standards_interval_count  ?
_diffrn_standards_interval_time   ?
_diffrn_standards_decay_%         ?
_diffrn_reflns_number             87060
_diffrn_reflns_av_R_equivalents   0.1451
_diffrn_reflns_av_sigmaI/netI     0.1491
_diffrn_reflns_limit_h_min        -19
_diffrn_reflns_limit_h_max        18
_diffrn_reflns_limit_k_min        -43
_diffrn_reflns_limit_k_max        42
_diffrn_reflns_limit_l_min        -27
_diffrn_reflns_limit_l_max        26
_diffrn_reflns_theta_min          2.03
_diffrn_reflns_theta_max          66.81
_reflns_number_total              22669
_reflns_number_gt                 14676
_reflns_threshold_expression      >2sigma(I)

_computing_data_collection        SMART
_computing_cell_refinement        SAINTPLUS
_computing_data_reduction         SAINTPLUS
_computing_structure_solution     SHELXTL
_computing_structure_refinement   'SHELXL-97 (Sheldrick, 1997)'

_refine_special_details
;
 Refinement of F^2^ against ALL reflections.  The weighted R-factor
wR and
 goodness of fit S are based on F^2^, conventional R-factors R are
based
 on F, with F set to zero for negative F^2^. The threshold expression
of
 F^2^ > 2sigma(F^2^) is used only for calculating R-factors(gt) etc.
and is
 not relevant to the choice of reflections for refinement.  R-factors
based
 on F^2^ are statistically about twice as large as those based on F,
and R-
 factors based on ALL data will be even larger.

The sample gave weak data at high angles, accounting for the low
```

theta-max
and completeness. This, combined with the large asymmetric unit, make anisotropic refinement of all non-hydrogen atoms impossible and account for
the range of ADPs obtained. The geometry was restrained for butyl groups of
the counterions and solvent molecules during refinement.

;

```
_refine_ls_structure_factor_coef  Fsqd
_refine_ls_matrix_type            fullcycle
_refine_ls_weighting_scheme       calc
_refine_ls_weighting_details
 'calc w=1/[\s^2^(Fo^2^)+(0.0974P)^2^+556.9941P] where P=(Fo^2^+2Fc^2
^)/3'
_atom_sites_solution_primary      direct
_atom_sites_solution_secondary    difmap
_atom_sites_solution_hydrogens    '.'
_refine_ls_hydrogen_treatment     constr
_refine_ls_extinction_method      none
_refine_ls_extinction_coef        ?
_refine_ls_number_reflns          22669
_refine_ls_number_parameters      1409
_refine_ls_number_restraints      625
_refine_ls_R_factor_all           0.1356
_refine_ls_R_factor_gt            0.0839
_refine_ls_wR_factor_ref          0.2272
_refine_ls_wR_factor_gt           0.1960
_refine_ls_goodness_of_fit_ref    1.018
_refine_ls_restrained_S_all       1.012
_refine_ls_shift/su_max           0.009
_refine_ls_shift/su_mean          0.001

loop_
 _atom_site_label
 _atom_site_type_symbol
 _atom_site_fract_x
 _atom_site_fract_y
 _atom_site_fract_z
 _atom_site_U_iso_or_equiv
 _atom_site_adp_type
 _atom_site_occupancy
 _atom_site_symmetry_multiplicity
 _atom_site_calc_flag
 _atom_site_refinement_flags
 _atom_site_disorder_assembly
 _atom_site_disorder_group
C1 C 0.559(2) 0.3610(8) 0.3901(16) 0.068(10) Uiso 1 1 d . . .
C2 C 0.563(4) 0.3738(14) 0.437(3) 0.15(2) Uiso 1 1 d . . .
C3 C 1.024(2) 0.3844(9) 0.3889(17) 0.074(11) Uiso 1 1 d D . .
C4 C 1.063(5) 0.3566(15) 0.406(4) 0.26(4) Uiso 1 1 d D . .
C5 C 0.6813(19) 0.5035(7) 0.1784(14) 0.050(9) Uiso 1 1 d D . .
C6 C 0.607(3) 0.5106(13) 0.147(2) 0.14(2) Uiso 1 1 d D . .
C7 C 1.060(2) 0.4115(8) 0.7187(16) 0.066(10) Uiso 1 1 d . . .
C8 C 1.115(3) 0.4122(10) 0.767(2) 0.095(14) Uiso 1 1 d . . .
C9 C 0.741(2) 0.5117(8) 0.8672(17) 0.068(10) Uiso 1 1 d D . .
C10 C 0.787(4) 0.5154(19) 0.918(2) 0.24(4) Uiso 1 1 d D . .
C11 C 0.789(2) 0.2979(9) 0.8850(18) 0.076(11) Uiso 1 1 d . . .
C12 C 0.838(4) 0.3009(13) 0.935(3) 0.14(2) Uiso 1 1 d . . .
C13 C 0.4897(19) 0.1859(7) 0.2928(12) 0.071(11) Uiso 1 1 d D . .
C14 C 0.554(2) 0.1777(9) 0.3452(14) 0.125(18) Uiso 1 1 d D . .
C15 C 0.532(2) 0.1493(11) 0.3699(15) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C16 C 0.601(2) 0.1403(11) 0.4203(13) 0.16(2) Uiso 1 1 d D . .
C17 C 0.580(2) 0.2173(9) 0.2610(18) 0.104(15) Uiso 1 1 d D . .
C18 C 0.576(2) 0.1915(10) 0.2209(15) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
```

C19 C 0.656(2) 0.1785(10) 0.2315(17) 0.124(18) Uiso 1 1 d D . .
C20 C 0.658(2) 0.1599(9) 0.1839(17) 0.097(14) Uiso 1 1 d D . .
C21 C 0.4407(19) 0.2221(8) 0.2212(11) 0.078(12) Uiso 1 1 d D . .
C22 C 0.4497(19) 0.2518(7) 0.1914(11) 0.089(13) Uiso 1 1 d D . .
C23 C 0.373(2) 0.2564(10) 0.1437(14) 0.123(17) Uiso 1 1 d D . .
C24 C 0.378(3) 0.2869(10) 0.1144(16) 0.118(17) Uiso 1 1 d D . .
C25 C 0.5034(16) 0.2463(6) 0.3070(12) 0.045(8) Uiso 1 1 d D . .
C26 C 0.437(2) 0.2463(8) 0.3248(15) 0.085(12) Uiso 1 1 d D . .
C27 C 0.440(3) 0.2795(10) 0.352(2) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C28 C 0.364(4) 0.2851(19) 0.356(4) 0.32(5) Uiso 1 1 d D . .
C29 C -0.002(2) 0.4501(7) 0.1633(13) 0.070(11) Uiso 1 1 d D . .
C30 C 0.042(2) 0.4564(9) 0.1300(12) 0.131(18) Uiso 1 1 d D . .
C31 C 0.030(3) 0.4269(11) 0.0938(17) 0.18(3) Uiso 1 1 d D . .
C32 C 0.064(5) 0.4339(18) 0.055(3) 0.28(5) Uiso 1 1 d D . .
C33 C -0.0031(19) 0.5092(7) 0.1758(14) 0.082(12) Uiso 1 1 d D . .
C34 C -0.090(2) 0.5157(10) 0.1430(17) 0.130(18) Uiso 1 1 d D . .
C35 C -0.096(3) 0.5428(12) 0.1030(19) 0.17(2) Uiso 1 1 d D . .
C36 C -0.185(3) 0.5470(16) 0.069(2) 0.22(3) Uiso 1 1 d D . .
C37 C -0.0476(18) 0.4702(8) 0.2336(12) 0.083(12) Uiso 1 1 d D . .
C38 C -0.039(2) 0.4933(8) 0.2773(13) 0.080(12) Uiso 1 1 d D . .
C39 C -0.092(3) 0.4811(11) 0.3038(18) 0.14(2) Uiso 1 1 d D . .
C40 C -0.087(3) 0.5024(12) 0.3483(17) 0.136(19) Uiso 1 1 d D . .
C41 C 0.0869(19) 0.4787(9) 0.2345(15) 0.113(16) Uiso 1 1 d D . .
C42 C 0.123(2) 0.4463(11) 0.2579(12) 0.16(2) Uiso 1 1 d D . .
C43 C 0.130(3) 0.4443(12) 0.3134(15) 0.17(3) Uiso 1 1 d D . .
C44 C 0.183(3) 0.4140(11) 0.3369(18) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C45 C 0.9182(14) 0.2832(8) 0.5192(12) 0.066(10) Uiso 1 1 d D . .
C46 C 0.9835(14) 0.2922(11) 0.5002(16) 0.114(16) Uiso 1 1 d D . .
C47 C 1.0616(17) 0.2865(13) 0.5494(17) 0.14(2) Uiso 1 1 d D . .
C48 C 1.1281(19) 0.2965(13) 0.534(2) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C49 C 0.8463(18) 0.2610(5) 0.4331(11) 0.050(9) Uiso 1 1 d D . .
C50 C 0.8636(19) 0.2258(5) 0.4510(11) 0.065(10) Uiso 1 1 d D . .
C51 C 0.8671(19) 0.2063(6) 0.4035(13) 0.067(10) Uiso 1 1 d D . .
C52 C 0.783(2) 0.1994(11) 0.3660(15) 0.128(18) Uiso 1 1 d D . .
C53 C 0.8267(17) 0.3160(5) 0.4528(12) 0.044(8) Uiso 1 1 d D . .
C54 C 0.8161(16) 0.3428(4) 0.4882(11) 0.040(8) Uiso 1 1 d D . .
C55 C 0.8130(19) 0.3754(5) 0.4578(13) 0.055(9) Uiso 1 1 d D . .
C56 C 0.7883(18) 0.4031(5) 0.4849(13) 0.048(8) Uiso 1 1 d D . .
C57 C 0.7930(13) 0.2721(6) 0.5061(11) 0.043(8) Uiso 1 1 d D . .
C58 C 0.7073(13) 0.2691(7) 0.4729(13) 0.060(10) Uiso 1 1 d D . .
C59 C 0.6679(16) 0.2519(8) 0.5050(13) 0.069(10) Uiso 1 1 d D . .
C60 C 0.5810(18) 0.2485(10) 0.4713(18) 0.112(16) Uiso 1 1 d D . .
C61 C 0.497(3) 0.2112(9) 0.644(2) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C62 C 0.553(3) 0.2016(11) 0.620(2) 0.17(2) Uiso 1 1 d D . .
C63 C 0.524(4) 0.1689(12) 0.593(3) 0.22(3) Uiso 1 1 d D . .
C64 C 0.565(5) 0.1611(15) 0.558(3) 0.22(3) Uiso 1 1 d D . .
C65 C 0.592(2) 0.2423(11) 0.7108(13) 0.126(18) Uiso 1 1 d D . .
C66 C 0.591(2) 0.2190(11) 0.7533(12) 0.126(18) Uiso 1 1 d D . .
C67 C 0.668(3) 0.2221(16) 0.8009(16) 0.21(3) Uiso 1 1 d D . .
C68 C 0.667(4) 0.2002(15) 0.8442(16) 0.19(3) Uiso 1 1 d D . .
C69 C 0.457(3) 0.2488(10) 0.695(2) 0.134(19) Uiso 1 1 d D . .
C70 C 0.447(6) 0.2850(12) 0.698(4) 0.31(5) Uiso 1 1 d D . .
C71 C 0.415(7) 0.2914(15) 0.739(3) 0.32(5) Uiso 1 1 d DU . .
C72 C 0.377(4) 0.3258(12) 0.725(3) 0.17(2) Uiso 1 1 d DU . .
C73 C 0.529(3) 0.2668(11) 0.6314(16) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C74 C 0.453(3) 0.2717(15) 0.5817(16) 0.20(3) Uiso 1 1 d D . .
C75 C 0.467(4) 0.2982(19) 0.549(2) 0.33(5) Uiso 1 1 d DU . .
C76 C 0.408(8) 0.293(3) 0.4919(18) 0.41(6) Uiso 1 1 d DU . .
C77 C 0.3346(15) 0.5119(7) 0.5796(10) 0.055(9) Uiso 1 1 d D . .
C78 C 0.3174(15) 0.4874(7) 0.5342(9) 0.053(9) Uiso 1 1 d D . .
C79 C 0.2373(17) 0.4969(7) 0.4920(11) 0.069(11) Uiso 1 1 d D . .
C80 C 0.217(2) 0.4714(9) 0.4478(12) 0.097(14) Uiso 1 1 d D . .
C81 C 0.4722(16) 0.5030(6) 0.6016(13) 0.050(9) Uiso 1 1 d D . .
C82 C 0.4956(17) 0.5364(6) 0.5894(13) 0.053(9) Uiso 1 1 d D . .
C83 C 0.5548(19) 0.5327(7) 0.5643(14) 0.068(10) Uiso 1 1 d D . .
C84 C 0.578(2) 0.5657(8) 0.5497(18) 0.094(13) Uiso 1 1 d D . .

C85 C 0.3978(16) 0.4704(6) 0.6458(12) 0.044(8) Uiso 1 1 d D . .
C86 C 0.3275(18) 0.4650(7) 0.6583(15) 0.071(11) Uiso 1 1 d D . .
C87 C 0.336(3) 0.4305(9) 0.683(2) 0.132(19) Uiso 1 1 d D . .
C88 C 0.275(3) 0.4259(11) 0.705(2) 0.14(2) Uiso 1 1 d D . .
C89 C 0.4037(15) 0.5279(6) 0.6620(10) 0.049(8) Uiso 1 1 d D . .
C90 C 0.475(2) 0.5227(7) 0.7137(10) 0.085(12) Uiso 1 1 d D . .
C91 C 0.494(2) 0.5562(8) 0.7406(13) 0.094(14) Uiso 1 1 d D . .
C92 C 0.550(3) 0.5503(10) 0.7969(13) 0.115(16) Uiso 1 1 d D . .
C93 C 0.5359(15) 0.3981(9) 0.8889(12) 0.093(13) Uiso 1 1 d D . .
C94 C 0.4571(13) 0.3972(10) 0.8959(14) 0.096(14) Uiso 1 1 d D . .
C95 C 0.3927(18) 0.3917(13) 0.8402(16) 0.14(2) Uiso 1 1 d D . .
C96 C 0.3153(18) 0.3920(13) 0.849(2) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C97 C 0.594(3) 0.3625(6) 0.9674(15) 0.092(13) Uiso 1 1 d D . .
C98 C 0.604(3) 0.3358(6) 0.9326(19) 0.118(17) Uiso 1 1 d D . .
C99 C 0.567(4) 0.3055(9) 0.937(3) 0.22(3) Uiso 1 1 d D . .
C100 C 0.588(3) 0.2776(8) 0.909(2) 0.14(2) Uiso 1 1 d D . .
C101 C 0.6603(17) 0.3990(10) 0.9240(15) 0.097(14) Uiso 1 1 d D . .
C102 C 0.7393(15) 0.3944(13) 0.9698(18) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C103 C 0.8022(19) 0.4062(12) 0.9519(19) 0.14(2) Uiso 1 1 d D . .
C104 C 0.8808(18) 0.3956(14) 0.992(2) 0.18(3) Uiso 1 1 d D . .
C105 C 0.591(3) 0.4209(7) 0.9797(17) 0.116(16) Uiso 1 1 d D . .
C106 C 0.594(3) 0.4555(6) 0.9598(17) 0.118(17) Uiso 1 1 d D . .
C107 C 0.601(4) 0.4786(8) 1.0052(19) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C108 C 0.608(4) 0.5133(8) 0.987(3) 0.18(3) Uiso 1 1 d D . .
N1 N 0.5053(11) 0.2176(4) 0.2722(7) 0.054(7) Uiso 1 1 d D . .
N2 N 0.0026(11) 0.4765(5) 0.2033(7) 0.074(9) Uiso 1 1 d D . .
N3 N 0.8413(9) 0.2826(4) 0.4769(8) 0.052(7) Uiso 1 1 d D . .
N4 N 0.5141(14) 0.2443(5) 0.6675(7) 0.124(14) Uiso 1 1 d D . .
N5 N 0.4061(9) 0.5035(4) 0.6233(6) 0.038(6) Uiso 1 1 d D . .
N6 N 0.5978(10) 0.3956(4) 0.9433(9) 0.084(10) Uiso 1 1 d D . .
O1 O 0.5785(10) 0.3086(4) 0.2683(7) 0.033(4) Uani 1 1 d U . .
O2 O 0.6658(10) 0.3363(4) 0.3498(8) 0.036(5) Uani 1 1 d U . .
O3 O 0.6728(10) 0.2719(4) 0.3392(8) 0.036(5) Uani 1 1 d U . .
O4 O 0.7787(10) 0.3098(4) 0.3186(8) 0.034(5) Uani 1 1 d U . .
O5 O 0.9211(10) 0.2823(4) 0.3347(8) 0.037(5) Uani 1 1 d U . .
O6 O 0.9043(11) 0.3473(4) 0.3469(8) 0.045(5) Uani 1 1 d U . .
O7 O 0.9427(10) 0.3272(4) 0.2608(8) 0.039(5) Uani 1 1 d U . .
O8 O 0.9417(11) 0.3887(4) 0.2885(8) 0.041(5) Uani 1 1 d U . .
O9 O 0.9982(12) 0.3715(5) 0.2083(9) 0.056(6) Uani 1 1 d U . .
O10 O 0.8605(10) 0.3996(4) 0.1876(8) 0.035(5) Uani 1 1 d U . .
O11 O 0.8138(11) 0.4365(4) 0.0986(8) 0.045(5) Uani 1 1 d U . .
O12 O 0.7629(10) 0.4503(4) 0.1807(8) 0.037(5) Uani 1 1 d U . .
O13 O 0.6740(10) 0.4209(4) 0.1017(7) 0.034(5) Uani 1 1 d U . .
O14 O 0.5251(11) 0.4213(4) 0.0989(8) 0.044(5) Uani 1 1 d U . .
O15 O 0.6317(10) 0.4432(4) 0.1837(7) 0.034(5) Uani 1 1 d U . .
O16 O 0.5642(9) 0.3849(4) 0.1893(7) 0.028(4) Uani 1 1 d U . .
O17 O 0.5643(10) 0.3696(4) 0.2930(7) 0.031(4) Uani 1 1 d U . .
O18 O 0.4586(9) 0.3442(4) 0.2119(7) 0.029(4) Uani 1 1 d U . .
O19 O 0.6750(9) 0.3457(4) 0.2510(7) 0.029(4) Uani 1 1 d U . .
O20 O 0.7135(9) 0.3898(3) 0.1873(7) 0.022(4) Uani 1 1 d U . .
O21 O 0.8169(9) 0.3528(4) 0.2502(7) 0.026(4) Uani 1 1 d U . .
O22 O 0.6932(11) 0.2793(4) 0.2436(8) 0.042(5) Uani 1 1 d U . .
O23 O 0.8287(10) 0.2852(4) 0.2414(8) 0.034(5) Uani 1 1 d U . .
O24 O 0.8728(9) 0.3380(4) 0.1633(7) 0.030(4) Uani 1 1 d U . .
O25 O 0.7700(10) 0.3738(4) 0.1037(7) 0.034(5) Uani 1 1 d U . .
O26 O 0.6007(10) 0.3648(4) 0.1052(8) 0.034(5) Uani 1 1 d U . .
O27 O 0.5664(11) 0.3224(4) 0.1680(8) 0.040(5) Uani 1 1 d U . .
O28 O 0.7223(9) 0.3275(4) 0.1712(7) 0.025(4) Uani 1 1 d U . .
O29 O 0.7528(12) 0.2326(5) 0.1889(9) 0.056(6) Uani 1 1 d U . .
O30 O 0.7915(11) 0.2848(4) 0.1336(8) 0.041(5) Uani 1 1 d U . .
O31 O 0.8240(11) 0.3205(4) 0.0568(8) 0.047(5) Uani 1 1 d U . .
O32 O 0.6880(11) 0.3208(4) 0.0717(8) 0.041(5) Uani 1 1 d U . .
O33 O 0.5364(12) 0.3056(5) 0.0615(9) 0.058(6) Uani 1 1 d U . .
O34 O 0.6481(10) 0.2764(4) 0.1382(7) 0.033(4) Uani 1 1 d U . .
O35 O 0.6641(12) 0.3978(4) 0.3604(9) 0.051(6) Uiso 1 1 d . . .
O36 O 0.8893(12) 0.4076(4) 0.3621(9) 0.052(6) Uiso 1 1 d . . .

O37 O 0.7179(11) 0.4660(4) 0.2633(8) 0.049(5) Uiso 1 1 d . . .
O38 O 0.9415(10) 0.3768(4) 0.7082(7) 0.033(4) Uani 1 1 d U . .
O39 O 0.9017(10) 0.3370(4) 0.6222(8) 0.036(5) Uani 1 1 d U . .
O40 O 0.8690(10) 0.4025(4) 0.6170(8) 0.037(5) Uani 1 1 d U . .
O41 O 0.9265(9) 0.4372(4) 0.7015(7) 0.030(4) Uani 1 1 d U . .
O42 O 0.8740(11) 0.4688(4) 0.6104(8) 0.048(5) Uani 1 1 d U . .
O43 O 0.7945(9) 0.4696(4) 0.6839(7) 0.029(4) Uani 1 1 d U . .
O44 O 0.7007(10) 0.5223(4) 0.6849(8) 0.040(5) Uani 1 1 d U . .
O45 O 0.7637(10) 0.4899(4) 0.7785(8) 0.036(5) Uani 1 1 d U . .
O46 O 0.6192(10) 0.4799(4) 0.7310(7) 0.033(4) Uani 1 1 d U . .
O47 O 0.6890(10) 0.4560(4) 0.8244(8) 0.037(5) Uani 1 1 d U . .
O48 O 0.5366(12) 0.4517(4) 0.7898(9) 0.051(5) Uani 1 1 d U . .
O49 O 0.6250(10) 0.3975(4) 0.7894(7) 0.031(4) Uani 1 1 d U . .
O50 O 0.5626(12) 0.3380(5) 0.8024(9) 0.056(6) Uani 1 1 d U . .
O51 O 0.7126(11) 0.3454(4) 0.8349(8) 0.048(5) Uani 1 1 d U . .
O52 O 0.6544(11) 0.3137(4) 0.7460(8) 0.043(5) Uani 1 1 d U . .
O53 O 0.7551(11) 0.2761(4) 0.7083(8) 0.050(5) Uani 1 1 d U . .
O54 O 0.8029(11) 0.3169(4) 0.7948(8) 0.042(5) Uani 1 1 d U . .
O55 O 0.8229(10) 0.3352(4) 0.6969(7) 0.032(4) Uani 1 1 d U . .
O56 O 0.8011(9) 0.4013(3) 0.6876(7) 0.021(4) Uani 1 1 d U . .
O57 O 0.7057(9) 0.4325(4) 0.7309(7) 0.026(4) Uani 1 1 d U . .
O58 O 0.7192(9) 0.3666(4) 0.7366(7) 0.027(4) Uani 1 1 d U . .
O59 O 0.7591(9) 0.3591(3) 0.6038(7) 0.024(4) Uani 1 1 d U . .
O60 O 0.7431(10) 0.4368(4) 0.5975(7) 0.034(5) Uani 1 1 d U . .
O61 O 0.6487(11) 0.4648(4) 0.6374(8) 0.043(5) Uani 1 1 d U . .
O62 O 0.5500(10) 0.4237(4) 0.6969(7) 0.030(4) Uani 1 1 d U . .
O63 O 0.5635(9) 0.3624(4) 0.7026(7) 0.028(4) Uani 1 1 d U . .
O64 O 0.6775(11) 0.3256(4) 0.6488(8) 0.041(5) Uani 1 1 d U . .
O65 O 0.6584(10) 0.3958(4) 0.6507(7) 0.030(4) Uani 1 1 d U . .
O66 O 0.6410(13) 0.3263(5) 0.5433(9) 0.061(6) Uani 1 1 d U . .
O67 O 0.6406(10) 0.3928(4) 0.5518(7) 0.031(4) Uani 1 1 d U . .
O68 O 0.6114(12) 0.4587(5) 0.5294(9) 0.054(6) Uani 1 1 d U . .
O69 O 0.5408(11) 0.4228(4) 0.5954(8) 0.041(5) Uani 1 1 d U . .
O70 O 0.4425(11) 0.3876(4) 0.6309(8) 0.047(5) Uani 1 1 d U . .
O71 O 0.5566(11) 0.3588(4) 0.6032(8) 0.048(5) Uani 1 1 d U . .
O72 O 0.9727(12) 0.4108(4) 0.7892(9) 0.053(6) Uiso 1 1 d . . .
O73 O 0.8266(14) 0.4597(5) 0.8552(10) 0.077(7) Uiso 1 1 d . . .
O74 O 0.8485(14) 0.3564(5) 0.8652(10) 0.077(7) Uiso 1 1 d . . .
Na1 Na 0.7643(16) 0.4297(6) 0.3419(12) 0.193(12) Uani 1 1 d . . .
Na2 Na 0.888(2) 0.4080(7) 0.8442(19) 0.26(2) Uani 1 1 d . . .
Si1 Si 0.7322(3) 0.35553(14) 0.2170(3) 0.0122(14) Uani 1 1 d U . .
Si2 Si 0.7248(4) 0.39939(14) 0.7050(3) 0.0161(15) Uani 1 1 d U . .
P1 P 0.6181(4) 0.36785(16) 0.3473(3) 0.036(2) Uani 1 1 d . . .
P2 P 0.9334(4) 0.38271(18) 0.3442(4) 0.044(2) Uani 1 1 d . . .
P3 P 0.7000(4) 0.46381(15) 0.2050(3) 0.039(2) Uani 1 1 d . . .
P4 P 0.9709(4) 0.40901(16) 0.7335(4) 0.040(2) Uani 1 1 d . . .
P5 P 0.7576(5) 0.47689(18) 0.8307(4) 0.049(2) Uani 1 1 d . . .
P6 P 0.7911(5) 0.33220(19) 0.8438(4) 0.051(3) Uani 1 1 d . . .
W1 W 0.67966(7) 0.30261(3) 0.30102(6) 0.0294(4) Uani 1 1 d . . .
W2 W 0.87177(7) 0.31122(3) 0.29791(6) 0.0379(4) Uani 1 1 d . . .
W3 W 0.91633(7) 0.36424(3) 0.22022(6) 0.0376(4) Uani 1 1 d . . .
W4 W 0.77462(7) 0.41383(3) 0.13607(6) 0.0310(4) Uani 1 1 d . . .
W5 W 0.60235(7) 0.40498(3) 0.13715(6) 0.0326(4) Uani 1 1 d . . .
W6 W 0.55126(7) 0.34625(3) 0.22506(6) 0.0310(4) Uani 1 1 d . . .
W7 W 0.74026(8) 0.27286(3) 0.18688(6) 0.0384(4) Uani 1 1 d . . .
W8 W 0.78610(8) 0.32706(3) 0.10666(6) 0.0381(4) Uani 1 1 d . . .
W9 W 0.61023(8) 0.31773(3) 0.10967(6) 0.0378(4) Uani 1 1 d . . .
W10 W 0.85309(7) 0.36315(3) 0.64991(6) 0.0297(4) Uani 1 1 d . . .
W11 W 0.83671(7) 0.44169(3) 0.64276(6) 0.0322(4) Uani 1 1 d . . .
W12 W 0.70591(7) 0.48280(3) 0.70207(6) 0.0324(4) Uani 1 1 d . . .
W13 W 0.60699(7) 0.44082(3) 0.76384(6) 0.0310(4) Uani 1 1 d . . .
W14 W 0.62602(7) 0.35309(3) 0.77201(6) 0.0395(4) Uani 1 1 d . . .
W15 W 0.74085(7) 0.31618(3) 0.71752(6) 0.0396(4) Uani 1 1 d . . .
W16 W 0.65470(7) 0.35369(3) 0.59043(6) 0.0449(5) Uani 1 1 d . . .
W17 W 0.63753(7) 0.43395(3) 0.58352(6) 0.0365(4) Uani 1 1 d . . .
W18 W 0.53553(7) 0.39097(3) 0.64620(6) 0.0394(4) Uani 1 1 d . . .

```
O78 O 0.288(5) 0.3681(19) 0.509(4) 0.37(4) Uiso 1 1 d . . .
O75 O 0.850(5) 0.5784(19) 0.444(4) 0.31(4) Uiso 1 1 d . . .
N7 N 0.972(2) 0.5713(10) 0.4706(19) 0.145(16) Uiso 1 1 d D . .
C109 C 1.039(3) 0.5504(13) 0.502(3) 0.20(3) Uiso 1 1 d D . .
C110 C 0.985(3) 0.6021(11) 0.450(2) 0.16(2) Uiso 1 1 d D . .
C111 C 0.892(3) 0.562(2) 0.465(5) 0.33(7) Uiso 1 1 d D . .
O76 O 0.210(3) 0.4084(13) 0.163(2) 0.24(2) Uiso 1 1 d D . .
N8 N 0.296(3) 0.3867(11) 0.2400(19) 0.168(19) Uiso 1 1 d D . .
C112 C 0.267(3) 0.4140(11) 0.205(2) 0.15(2) Uiso 1 1 d D . .
C113 C 0.271(4) 0.3527(10) 0.219(2) 0.18(3) Uiso 1 1 d D . .
C114 C 0.355(4) 0.3895(15) 0.2943(19) 0.23(4) Uiso 1 1 d D . .
O77 O 0.398(6) 0.359(2) -0.011(3) 0.41(5) Uiso 1 1 d D . .
N9 N 0.344(2) 0.3696(8) 0.0539(15) 0.144(16) Uiso 1 1 d D . .
C115 C 0.403(4) 0.3640(14) 0.034(3) 0.18(3) Uiso 1 1 d D . .
C116 C 0.356(4) 0.3903(13) 0.098(2) 0.18(3) Uiso 1 1 d D . .
C117 C 0.267(2) 0.3515(18) 0.028(2) 0.46(9) Uiso 1 1 d D . .

loop_
 _atom_site_aniso_label
 _atom_site_aniso_U_11
 _atom_site_aniso_U_22
 _atom_site_aniso_U_33
 _atom_site_aniso_U_23
 _atom_site_aniso_U_13
 _atom_site_aniso_U_12
O1 0.033(5) 0.033(5) 0.033(5) 0.0001(10) 0.014(2) -0.0004(10)
O2 0.036(5) 0.036(5) 0.036(5) 0.0001(10) 0.015(2) 0.0000(10)
O3 0.036(5) 0.036(5) 0.037(5) 0.0001(10) 0.016(2) -0.0003(10)
O4 0.034(5) 0.034(5) 0.034(5) 0.0001(10) 0.014(2) -0.0001(10)
O5 0.037(5) 0.037(5) 0.037(5) 0.0001(10) 0.016(2) 0.0002(10)
O6 0.045(5) 0.045(5) 0.045(5) 0.0003(10) 0.019(2) -0.0002(10)
O7 0.039(5) 0.038(5) 0.039(5) 0.0000(10) 0.016(2) 0.0001(10)
O8 0.041(5) 0.041(5) 0.041(5) 0.0000(10) 0.017(2) -0.0001(10)
O9 0.056(6) 0.056(6) 0.056(6) 0.0000(10) 0.024(3) 0.0001(10)
O10 0.035(5) 0.035(5) 0.036(5) -0.0002(10) 0.015(2) 0.0001(10)
O11 0.045(5) 0.045(5) 0.045(5) 0.0000(10) 0.019(2) 0.0001(10)
O12 0.037(5) 0.036(5) 0.037(5) 0.0002(10) 0.015(2) -0.0002(10)
O13 0.034(5) 0.034(5) 0.034(5) 0.0003(10) 0.015(2) -0.0004(10)
O14 0.044(5) 0.044(5) 0.044(5) 0.0000(10) 0.019(2) 0.0005(10)
O15 0.034(5) 0.034(5) 0.034(5) 0.0001(10) 0.015(2) 0.0001(10)
O16 0.028(4) 0.028(4) 0.028(4) 0.0000(10) 0.012(2) 0.0002(10)
O17 0.031(4) 0.031(4) 0.031(4) -0.0001(10) 0.013(2) 0.0004(10)
O18 0.029(4) 0.029(4) 0.029(4) -0.0001(10) 0.012(2) -0.0001(10)
O19 0.029(4) 0.028(4) 0.029(4) -0.0003(10) 0.012(2) 0.0000(10)
O20 0.022(4) 0.022(4) 0.022(4) 0.0000(10) 0.0094(19) -0.0002(10)
O21 0.026(4) 0.027(4) 0.027(4) 0.0000(10) 0.011(2) -0.0001(10)
O22 0.042(5) 0.041(5) 0.042(5) 0.0002(10) 0.018(2) -0.0001(10)
O23 0.034(5) 0.034(5) 0.035(5) 0.0002(10) 0.015(2) 0.0001(10)
O24 0.030(4) 0.030(4) 0.030(4) 0.0000(10) 0.013(2) 0.0000(10)
O25 0.034(5) 0.033(5) 0.033(5) 0.0000(10) 0.014(2) -0.0002(10)
O26 0.034(5) 0.034(5) 0.034(5) 0.0001(10) 0.015(2) 0.0001(10)
O27 0.040(5) 0.040(5) 0.040(5) -0.0001(10) 0.017(2) -0.0003(10)
O28 0.025(4) 0.025(4) 0.025(4) 0.0000(10) 0.011(2) 0.0000(10)
O29 0.056(6) 0.056(6) 0.056(6) -0.0002(10) 0.024(3) 0.0000(10)
O30 0.041(5) 0.041(5) 0.041(5) 0.0000(10) 0.018(2) 0.0002(10)
O31 0.047(5) 0.046(5) 0.046(5) -0.0002(10) 0.020(2) -0.0001(10)
O32 0.041(5) 0.041(5) 0.041(5) 0.0001(10) 0.018(2) 0.0001(10)
O33 0.057(6) 0.057(6) 0.058(6) 0.0000(10) 0.025(3) -0.0003(10)
O34 0.033(5) 0.033(5) 0.033(5) -0.0001(10) 0.014(2) -0.0002(10)
O38 0.032(5) 0.032(5) 0.033(5) 0.0001(10) 0.014(2) 0.0000(10)
O39 0.036(5) 0.036(5) 0.036(5) 0.0000(10) 0.015(2) -0.0001(10)
O40 0.037(5) 0.037(5) 0.037(5) 0.0003(10) 0.016(2) -0.0002(10)
O41 0.029(4) 0.029(4) 0.030(4) -0.0002(10) 0.012(2) 0.0000(10)
O42 0.048(5) 0.048(5) 0.048(5) 0.0001(10) 0.021(2) 0.0001(10)
O43 0.029(4) 0.029(4) 0.029(4) 0.0002(10) 0.012(2) -0.0003(10)
O44 0.040(5) 0.039(5) 0.040(5) 0.0002(10) 0.017(2) -0.0001(10)
```

O45 0.036(5) 0.036(5) 0.036(5) 0.0000(10) 0.015(2) -0.0001(10)
O46 0.033(5) 0.033(5) 0.033(5) -0.0001(10) 0.014(2) 0.0002(10)
O47 0.037(5) 0.037(5) 0.037(5) -0.0003(10) 0.016(2) 0.0000(10)
O48 0.051(6) 0.051(6) 0.051(6) 0.0000(10) 0.022(3) 0.0002(10)
O49 0.031(4) 0.031(4) 0.031(4) 0.0002(10) 0.013(2) -0.0002(10)
O50 0.056(6) 0.056(6) 0.056(6) 0.0003(10) 0.024(3) -0.0002(10)
O51 0.048(5) 0.048(5) 0.048(5) 0.0000(10) 0.020(2) 0.0003(10)
O52 0.043(5) 0.043(5) 0.043(5) 0.0002(10) 0.018(2) -0.0002(10)
O53 0.050(5) 0.050(5) 0.050(6) 0.0000(10) 0.021(2) 0.0001(10)
O54 0.042(5) 0.042(5) 0.042(5) 0.0003(10) 0.018(2) 0.0002(10)
O55 0.032(4) 0.032(4) 0.032(5) -0.0003(10) 0.013(2) 0.0003(10)
O56 0.021(4) 0.021(4) 0.021(4) 0.0001(10) 0.0089(19) -0.0001(10)
O57 0.026(4) 0.026(4) 0.026(4) -0.0002(10) 0.011(2) 0.0003(10)
O58 0.027(4) 0.027(4) 0.027(4) 0.0005(10) 0.011(2) -0.0006(10)
O59 0.024(4) 0.024(4) 0.024(4) -0.0003(10) 0.010(2) 0.0004(10)
O60 0.034(5) 0.034(5) 0.035(5) 0.0000(10) 0.015(2) 0.0003(10)
O61 0.043(5) 0.043(5) 0.043(5) -0.0001(10) 0.018(2) 0.0002(10)
O62 0.030(4) 0.030(4) 0.030(4) -0.0002(10) 0.013(2) 0.0004(10)
O63 0.028(4) 0.027(4) 0.028(4) 0.0001(10) 0.011(2) -0.0001(10)
O64 0.041(5) 0.040(5) 0.041(5) -0.0001(7) 0.017(2) 0.0000(7)
O65 0.030(4) 0.029(4) 0.030(4) -0.0002(10) 0.012(2) 0.0001(10)
O66 0.061(6) 0.061(6) 0.061(6) -0.0003(10) 0.026(3) 0.0002(10)
O67 0.031(4) 0.031(4) 0.031(4) -0.0001(10) 0.013(2) 0.0004(10)
O68 0.054(6) 0.054(6) 0.054(6) 0.0001(10) 0.023(3) 0.0002(10)
O69 0.041(5) 0.041(5) 0.041(5) -0.0003(10) 0.017(2) 0.0000(10)
O70 0.047(5) 0.047(5) 0.047(5) -0.0002(10) 0.020(2) 0.0001(10)
O71 0.047(5) 0.047(5) 0.048(5) -0.0001(10) 0.020(2) 0.0002(10)
Na1 0.15(2) 0.17(2) 0.21(3) 0.07(2) 0.03(2) 0.007(17)
Na2 0.28(4) 0.15(2) 0.45(6) 0.00(3) 0.26(5) 0.03(2)
Si1 0.0124(16) 0.0113(16) 0.0123(17) 0.0006(10) 0.0047(11) -0.0003(9)
Si2 0.0161(17) 0.0148(17) 0.0158(18) 0.0003(10) 0.0055(11) 0.0000(9)
P1 0.038(4) 0.034(4) 0.026(6) -0.005(4) 0.004(4) -0.008(3)
P2 0.026(4) 0.047(5) 0.041(7) 0.000(4) -0.003(4) -0.017(3)
P3 0.046(5) 0.012(4) 0.048(7) -0.004(4) 0.010(5) 0.000(3)
P4 0.021(4) 0.028(4) 0.064(7) -0.001(4) 0.009(4) 0.004(3)
P5 0.043(5) 0.044(5) 0.046(7) -0.016(4) 0.005(5) -0.003(4)
P6 0.045(5) 0.050(5) 0.051(7) 0.027(5) 0.013(5) 0.014(4)
W1 0.0249(7) 0.0176(6) 0.0353(10) 0.0054(6) 0.0032(7) -0.0045(5)
W2 0.0239(7) 0.0222(7) 0.0541(12) 0.0134(7) 0.0039(7) 0.0055(5)
W3 0.0250(7) 0.0294(7) 0.0531(12) 0.0070(7) 0.0118(8) -0.0010(5)
W4 0.0374(8) 0.0148(6) 0.0341(11) 0.0023(6) 0.0091(7) -0.0040(5)
W5 0.0293(7) 0.0182(6) 0.0324(10) 0.0024(6) -0.0036(7) 0.0026(5)
W6 0.0191(7) 0.0260(7) 0.0359(11) 0.0000(6) 0.0003(7) -0.0038(5)
W7 0.0482(9) 0.0083(6) 0.0516(12) -0.0046(6) 0.0148(8) 0.0003(5)
W8 0.0502(9) 0.0213(7) 0.0431(12) -0.0073(7) 0.0203(8) 0.0008(6)
W9 0.0413(8) 0.0219(7) 0.0333(11) -0.0093(7) 0.0002(8) -0.0089(5)
W10 0.0230(7) 0.0202(7) 0.0349(11) 0.0006(6) 0.0022(7) 0.0071(5)
W11 0.0278(7) 0.0206(7) 0.0407(11) 0.0102(6) 0.0076(7) 0.0024(5)
W12 0.0334(7) 0.0115(6) 0.0430(11) -0.0004(6) 0.0076(7) -0.0004(5)
W13 0.0272(7) 0.0191(7) 0.0393(11) -0.0015(6) 0.0075(7) 0.0026(5)
W14 0.0314(8) 0.0210(7) 0.0643(13) 0.0109(7) 0.0188(8) 0.0016(5)
W15 0.0302(7) 0.0129(6) 0.0668(13) 0.0063(7) 0.0126(8) 0.0033(5)
W16 0.0273(7) 0.0315(8) 0.0495(12) -0.0226(7) -0.0084(8) 0.0079(5)
W17 0.0318(8) 0.0318(7) 0.0297(11) 0.0017(7) -0.0022(7) 0.0132(5)
W18 0.0175(7) 0.0233(7) 0.0562(12) -0.0099(7) -0.0043(7) 0.0012(5)

_geom_special_details
;
 All esds (except the esd in the dihedral angle between two l.s. planes)
 are estimated using the full covariance matrix. The cell esds are taken
 into account individually in the estimation of esds in distances, angles
 and torsion angles; correlations between esds in cell parameters are only

```
 used when they are defined by crystal symmetry.  An approximate
(isotropic)
 treatment of cell esds is used for estimating esds involving l.s.
planes.
;

loop_
 _geom_bond_atom_site_label_1
 _geom_bond_atom_site_label_2
 _geom_bond_distance
 _geom_bond_site_symmetry_2
 _geom_bond_publ_flag
C1 C2 1.40(7) . ?
C1 P1 1.98(4) . ?
C3 C4 1.33(3) . ?
C3 P2 1.63(4) . ?
C5 C6 1.32(3) . ?
C5 P3 1.78(3) . ?
C7 C8 1.31(5) . ?
C7 P4 1.89(3) . ?
C9 C10 1.33(3) . ?
C9 P5 1.87(4) . ?
C11 C12 1.33(6) . ?
C11 P6 1.85(4) . ?
C13 C14 1.50(3) . ?
C13 N1 1.51(2) . ?
C14 C15 1.51(3) . ?
C15 C16 1.50(3) . ?
C17 C18 1.54(3) . ?
C17 N1 1.55(3) . ?
C18 C19 1.48(3) . ?
C19 C20 1.57(3) . ?
C21 N1 1.44(3) . ?
C21 C22 1.54(3) . ?
C22 C23 1.50(3) . ?
C23 C24 1.53(3) . ?
C25 C26 1.52(3) . ?
C25 N1 1.55(2) . ?
C26 C27 1.56(3) . ?
C27 C28 1.50(3) . ?
C29 C30 1.52(3) . ?
C29 N2 1.55(2) . ?
C30 C31 1.55(3) . ?
C31 C32 1.51(3) . ?
C33 C34 1.51(3) . ?
C33 N2 1.54(3) . ?
C34 C35 1.56(3) . ?
C35 C36 1.54(3) . ?
C37 C38 1.52(3) . ?
C37 N2 1.54(3) . ?
C38 C39 1.55(3) . ?
C39 C40 1.51(3) . ?
C41 N2 1.44(3) . ?
C41 C42 1.52(3) . ?
C42 C43 1.52(3) . ?
C43 C44 1.56(3) . ?
C45 N3 1.42(3) . ?
C45 C46 1.58(3) . ?
C46 C47 1.54(3) . ?
C47 C48 1.54(3) . ?
C49 C50 1.53(3) . ?
C49 N3 1.56(2) . ?
C50 C51 1.60(3) . ?
C51 C52 1.51(3) . ?
C53 N3 1.51(2) . ?
C53 C54 1.56(3) . ?
```

C54 C55 1.59(3) . ?
C55 C56 1.56(3) . ?
C57 C58 1.48(3) . ?
C57 N3 1.53(2) . ?
C58 C59 1.57(3) . ?
C59 C60 1.50(3) . ?
C61 N4 1.49(3) . ?
C61 C62 1.55(3) . ?
C62 C63 1.54(3) . ?
C63 C64 1.52(3) . ?
C65 N4 1.45(3) . ?
C65 C66 1.55(3) . ?
C66 C67 1.50(3) . ?
C67 C68 1.53(3) . ?
C69 C70 1.52(3) . ?
C69 N4 1.57(3) . ?
C70 C71 1.54(3) . ?
C71 C72 1.56(3) . ?
C73 N4 1.49(3) . ?
C73 C74 1.52(3) . ?
C74 C75 1.52(3) . ?
C75 C76 1.540(6) . ?
C77 N5 1.42(2) . ?
C77 C78 1.56(3) . ?
C78 C79 1.51(3) . ?
C79 C80 1.55(3) . ?
C81 C82 1.53(2) . ?
C81 N5 1.60(2) . ?
C82 C83 1.56(3) . ?
C83 C84 1.54(3) . ?
C85 C86 1.52(3) . ?
C85 N5 1.54(2) . ?
C86 C87 1.56(3) . ?
C87 C88 1.52(3) . ?
C89 N5 1.51(2) . ?
C89 C90 1.51(3) . ?
C90 C91 1.55(3) . ?
C91 C92 1.51(3) . ?
C93 N6 1.48(3) . ?
C93 C94 1.57(3) . ?
C94 C95 1.54(3) . ?
C95 C96 1.57(3) . ?
C97 C98 1.54(3) . ?
C97 N6 1.55(3) . ?
C98 C99 1.46(3) . ?
C99 C100 1.55(3) . ?
C101 N6 1.50(3) . ?
C101 C102 1.50(3) . ?
C102 C103 1.55(3) . ?
C103 C104 1.49(3) . ?
C105 N6 1.51(3) . ?
C105 C106 1.54(3) . ?
C106 C107 1.56(3) . ?
C107 C108 1.54(3) . ?
O1 W1 1.732(17) . ?
O1 W6 1.908(17) . ?
O2 P1 1.563(16) . ?
O2 W1 2.054(18) . ?
O3 W1 1.708(17) . ?
O4 W1 1.727(16) . ?
O4 W2 2.066(17) . ?
O5 W2 1.592(17) . ?
O6 P2 1.576(17) . ?
O6 W2 1.947(19) . ?
O7 W3 1.848(18) . ?
O7 W2 2.123(18) . ?

```
O8 P2 1.67(2) . ?
O8 W3 2.049(19) . ?
O9 W3 1.73(2) . ?
O10 W4 1.745(18) . ?
O10 W3 1.803(17) . ?
O11 W4 1.793(19) . ?
O12 P3 1.696(17) . ?
O12 W4 2.037(18) . ?
O13 W4 1.734(17) . ?
O13 W5 2.099(17) . ?
O14 W5 1.541(19) . ?
O15 P3 1.436(16) . ?
O15 W5 1.977(17) . ?
O16 W6 1.960(16) . ?
O16 W5 2.071(17) . ?
O17 P1 1.433(19) . ?
O17 W6 2.071(18) . ?
O18 W6 1.613(16) . ?
O19 Si1 1.768(17) . ?
O19 W6 2.109(16) . ?
O19 W1 2.253(16) . ?
O20 Si1 1.607(15) . ?
O20 W5 2.051(15) . ?
O20 W4 2.414(16) . ?
O21 Si1 1.460(16) . ?
O21 W2 2.153(16) . ?
O21 W3 2.403(16) . ?
O22 W1 1.998(19) . ?
O22 W7 2.157(19) . ?
O23 W7 1.786(18) . ?
O23 W2 1.805(18) . ?
O24 W8 1.782(17) . ?
O24 W3 1.819(17) . ?
O25 W4 1.875(16) . ?
O25 W8 1.948(16) . ?
O26 W5 1.882(17) . ?
O26 W9 1.952(16) . ?
O27 W6 2.016(19) . ?
O27 W9 2.146(19) . ?
O28 Si1 1.690(16) . ?
O28 W9 2.112(16) . ?
O28 W7 2.295(15) . ?
O29 W7 1.678(19) . ?
O30 W8 1.891(17) . ?
O30 W7 2.166(19) . ?
O31 W8 1.85(2) . ?
O32 W8 1.691(18) . ?
O32 W9 2.156(18) . ?
O33 W9 1.55(2) . ?
O34 W7 1.690(18) . ?
O34 W9 1.891(16) . ?
O35 P1 1.462(18) . ?
O35 Na1 2.53(3) . ?
O36 P2 1.537(19) . ?
O36 Na1 2.34(3) . ?
O37 P3 1.54(2) . ?
O37 Na1 2.51(3) . ?
O38 P4 1.501(16) . ?
O38 W10 1.853(18) . ?
O39 W10 1.797(17) . ?
O40 W10 1.960(17) . ?
O40 W11 1.972(17) . ?
O41 P4 1.490(16) . ?
O41 W11 1.797(17) . ?
O42 W11 1.770(19) . ?
O43 W12 2.013(16) . ?
```

O43 W11 2.027(16) . ?
O44 W12 1.693(17) . ?
O45 P5 1.623(19) . ?
O45 W12 1.982(19) . ?
O46 W13 1.925(17) . ?
O46 W12 2.115(17) . ?
O47 P5 1.494(17) . ?
O47 W13 1.852(19) . ?
O48 W13 1.82(2) . ?
O49 W14 1.901(16) . ?
O49 W13 1.904(16) . ?
O50 W14 1.85(2) . ?
O51 P6 1.485(18) . ?
O51 W14 1.85(2) . ?
O52 W14 1.950(18) . ?
O52 W15 2.100(18) . ?
O53 W15 1.714(18) . ?
O54 P6 1.624(19) . ?
O54 W15 1.99(2) . ?
O55 W10 2.020(17) . ?
O55 W15 2.022(16) . ?
O56 Si2 1.703(15) . ?
O56 W10 2.338(15) . ?
O56 W11 2.360(15) . ?
O57 Si2 1.663(15) . ?
O57 W12 2.233(15) . ?
O57 W13 2.426(16) . ?
O58 Si2 1.651(16) . ?
O58 W15 2.231(15) . ?
O58 W14 2.424(16) . ?
O59 W10 1.690(16) . ?
O59 W16 1.839(15) . ?
O60 W11 1.682(18) . ?
O60 W17 1.846(16) . ?
O61 W12 1.84(2) . ?
O61 W17 1.930(19) . ?
O62 W13 1.869(18) . ?
O62 W18 1.905(17) . ?
O63 W14 1.844(18) . ?
O63 W18 1.872(17) . ?
O64 W15 1.83(2) . ?
O64 W16 1.913(19) . ?
O65 Si2 1.515(18) . ?
O65 W18 2.260(16) . ?
O65 W17 2.368(17) . ?
O65 W16 2.418(17) . ?
O66 W16 1.68(2) . ?
O67 W16 1.905(16) . ?
O67 W17 1.933(16) . ?
O68 W17 1.73(2) . ?
O69 W18 1.982(19) . ?
O69 W17 2.034(18) . ?
O70 W18 1.610(19) . ?
O71 W18 1.953(19) . ?
O71 W16 2.032(19) . ?
O72 P4 1.56(2) . ?
O72 Na2 2.66(3) . ?
O73 P5 1.37(2) . ?
O73 Na2 2.51(3) . ?
O74 P6 1.40(2) . ?
O74 Na2 2.42(3) . ?
W1 W6 3.0352(17) . ?
W7 W9 3.0934(19) . ?
O75 C111 1.02(11) . ?
N7 C110 1.46(3) . ?
N7 C109 1.47(3) . ?

```
N7 C111 1.48(3) . ?
O76 C112 1.24(3) . ?
N8 C112 1.44(3) . ?
N8 C114 1.46(3) . ?
N8 C113 1.52(5) . ?
O77 C115 1.24(3) . ?
N9 C116 1.44(3) . ?
N9 C115 1.47(3) . ?
N9 C117 1.51(3) . ?

loop_
 _geom_angle_atom_site_label_1
 _geom_angle_atom_site_label_2
 _geom_angle_atom_site_label_3
 _geom_angle
 _geom_angle_site_symmetry_1
 _geom_angle_site_symmetry_3
 _geom_angle_publ_flag
C2 C1 P1 135(3) . . ?
C4 C3 P2 118(5) . . ?
C6 C5 P3 117(3) . . ?
C8 C7 P4 99(3) . . ?
C10 C9 P5 120(5) . . ?
C12 C11 P6 114(4) . . ?
C14 C13 N1 112(2) . . ?
C13 C14 C15 112(3) . . ?
C16 C15 C14 110(3) . . ?
C18 C17 N1 114(2) . . ?
C19 C18 C17 112(3) . . ?
C18 C19 C20 113(3) . . ?
N1 C21 C22 114(2) . . ?
C23 C22 C21 108(2) . . ?
C22 C23 C24 109(3) . . ?
C26 C25 N1 117.2(19) . . ?
C25 C26 C27 108(2) . . ?
C28 C27 C26 110(3) . . ?
C30 C29 N2 117(2) . . ?
C29 C30 C31 109(3) . . ?
C32 C31 C30 111(3) . . ?
C34 C33 N2 107(2) . . ?
C33 C34 C35 107(3) . . ?
C36 C35 C34 105(3) . . ?
C38 C37 N2 118(2) . . ?
C37 C38 C39 109(2) . . ?
C40 C39 C38 113(3) . . ?
N2 C41 C42 112(3) . . ?
C41 C42 C43 109(3) . . ?
C42 C43 C44 104(3) . . ?
N3 C45 C46 112(2) . . ?
C47 C46 C45 103(2) . . ?
C48 C47 C46 106(3) . . ?
C50 C49 N3 110.9(19) . . ?
C49 C50 C51 106(2) . . ?
C52 C51 C50 106(2) . . ?
N3 C53 C54 113.8(19) . . ?
C53 C54 C55 103.7(18) . . ?
C56 C55 C54 107.7(19) . . ?
C58 C57 N3 114(2) . . ?
C57 C58 C59 109(2) . . ?
C60 C59 C58 109(2) . . ?
N4 C61 C62 111(3) . . ?
C63 C62 C61 106(3) . . ?
C64 C63 C62 110(3) . . ?
N4 C65 C66 111(3) . . ?
C67 C66 C65 108(3) . . ?
C66 C67 C68 109(3) . . ?
```

```
C70 C69 N4 106(2) . . ?
C69 C70 C71 108(3) . . ?
C70 C71 C72 104(3) . . ?
N4 C73 C74 110(3) . . ?
C73 C74 C75 109(3) . . ?
C74 C75 C76 108(3) . . ?
N5 C77 C78 110.1(18) . . ?
C79 C78 C77 105.5(19) . . ?
C78 C79 C80 106(2) . . ?
C82 C81 N5 114.9(18) . . ?
C81 C82 C83 110.2(19) . . ?
C84 C83 C82 112(2) . . ?
C86 C85 N5 118.6(19) . . ?
C85 C86 C87 108(2) . . ?
C88 C87 C86 110(3) . . ?
N5 C89 C90 108.7(19) . . ?
C89 C90 C91 106(2) . . ?
C92 C91 C90 107(2) . . ?
N6 C93 C94 103(2) . . ?
C95 C94 C93 104(2) . . ?
C94 C95 C96 102(2) . . ?
C98 C97 N6 108(2) . . ?
C99 C98 C97 112(3) . . ?
C98 C99 C100 111(3) . . ?
N6 C101 C102 108(2) . . ?
C101 C102 C103 107(3) . . ?
C104 C103 C102 107(3) . . ?
N6 C105 C106 111(3) . . ?
C105 C106 C107 105(2) . . ?
C108 C107 C106 107(3) . . ?
C21 N1 C13 106.3(17) . . ?
C21 N1 C25 107.5(18) . . ?
C13 N1 C25 110.7(17) . . ?
C21 N1 C17 104(2) . . ?
C13 N1 C17 114(2) . . ?
C25 N1 C17 113.8(16) . . ?
C41 N2 C33 94.2(18) . . ?
C41 N2 C37 116(2) . . ?
C33 N2 C37 120.1(19) . . ?
C41 N2 C29 101(2) . . ?
C33 N2 C29 106(2) . . ?
C37 N2 C29 115.5(16) . . ?
C45 N3 C53 106.6(17) . . ?
C45 N3 C57 99.7(16) . . ?
C53 N3 C57 118.0(14) . . ?
C45 N3 C49 107.1(17) . . ?
C53 N3 C49 102.9(14) . . ?
C57 N3 C49 121.3(15) . . ?
C65 N4 C61 106(3) . . ?
C65 N4 C73 102(2) . . ?
C61 N4 C73 110(3) . . ?
C65 N4 C69 104(3) . . ?
C61 N4 C69 105(2) . . ?
C73 N4 C69 129(3) . . ?
C77 N5 C89 99.1(14) . . ?
C77 N5 C85 110.5(16) . . ?
C89 N5 C85 104.5(16) . . ?
C77 N5 C81 105.3(17) . . ?
C89 N5 C81 123.9(15) . . ?
C85 N5 C81 112.4(13) . . ?
C93 N6 C101 89.9(19) . . ?
C93 N6 C105 114(2) . . ?
C101 N6 C105 120(2) . . ?
C93 N6 C97 111(2) . . ?
C101 N6 C97 116(2) . . ?
C105 N6 C97 106.0(19) . . ?
```

```
W1 O1 W6 112.9(8) . . ?
P1 O2 W1 140.3(12) . . ?
W1 O4 W2 148.9(11) . . ?
P2 O6 W2 133.1(12) . . ?
W3 O7 W2 120.6(9) . . ?
P2 O8 W3 137.8(10) . . ?
W4 O10 W3 145.5(10) . . ?
P3 O12 W4 140.8(10) . . ?
W4 O13 W5 116.3(9) . . ?
P3 O15 W5 134.1(11) . . ?
W6 O16 W5 148.5(9) . . ?
P1 O17 W6 136.1(10) . . ?
Si1 O19 W6 129.8(10) . . ?
Si1 O19 W1 130.9(8) . . ?
W6 O19 W1 88.1(6) . . ?
Si1 O20 W5 124.0(8) . . ?
Si1 O20 W4 128.6(8) . . ?
W5 O20 W4 93.5(6) . . ?
Si1 O21 W2 124.0(9) . . ?
Si1 O21 W3 123.4(10) . . ?
W2 O21 W3 98.4(6) . . ?
W1 O22 W7 154.4(9) . . ?
W7 O23 W2 146.2(10) . . ?
W8 O24 W3 146.8(9) . . ?
W4 O25 W8 151.5(11) . . ?
W5 O26 W9 149.8(11) . . ?
W6 O27 W9 153.4(9) . . ?
Si1 O28 W9 120.4(8) . . ?
Si1 O28 W7 124.5(9) . . ?
W9 O28 W7 89.1(5) . . ?
W8 O30 W7 121.9(9) . . ?
W8 O32 W9 120.9(11) . . ?
W7 O34 W9 119.4(9) . . ?
P1 O35 Na1 143.0(12) . . ?
P2 O36 Na1 143.4(12) . . ?
P3 O37 Na1 138.6(10) . . ?
P4 O38 W10 134.4(11) . . ?
W10 O40 W11 111.8(9) . . ?
P4 O41 W11 134.3(10) . . ?
W12 O43 W11 150.4(9) . . ?
P5 O45 W12 136.7(10) . . ?
W13 O46 W12 120.4(8) . . ?
P5 O47 W13 129.4(12) . . ?
W14 O49 W13 145.8(11) . . ?
P6 O51 W14 128.3(13) . . ?
W14 O52 W15 119.1(8) . . ?
P6 O54 W15 135.7(11) . . ?
W10 O55 W15 151.1(9) . . ?
Si2 O56 W10 131.9(7) . . ?
Si2 O56 W11 131.0(8) . . ?
W10 O56 W11 87.7(5) . . ?
Si2 O57 W12 124.6(9) . . ?
Si2 O57 W13 129.1(8) . . ?
W12 O57 W13 97.5(5) . . ?
Si2 O58 W15 125.0(9) . . ?
Si2 O58 W14 129.6(8) . . ?
W15 O58 W14 97.1(5) . . ?
W10 O59 W16 146.5(11) . . ?
W11 O60 W17 147.2(12) . . ?
W12 O61 W17 151.1(11) . . ?
W13 O62 W18 150.2(9) . . ?
W14 O63 W18 149.1(9) . . ?
W15 O64 W16 148.0(10) . . ?
Si2 O65 W18 115.9(10) . . ?
Si2 O65 W17 122.2(8) . . ?
W18 O65 W17 101.6(6) . . ?
```

```
Si2 O65 W16 123.3(8) . . ?
W18 O65 W16 100.2(6) . . ?
W17 O65 W16 88.1(6) . . ?
W16 O67 W17 120.2(10) . . ?
W18 O69 W17 126.6(9) . . ?
W18 O71 W16 128.5(10) . . ?
P4 O72 Na2 145.9(11) . . ?
P5 O73 Na2 139.5(15) . . ?
P6 O74 Na2 141.5(16) . . ?
O36 Na1 O37 112.2(12) . . ?
O36 Na1 O35 120.0(10) . . ?
O37 Na1 O35 119.4(10) . . ?
O74 Na2 O73 120.8(12) . . ?
O74 Na2 O72 120.5(11) . . ?
O73 Na2 O72 117.3(12) . . ?
O21 Si1 O20 109.7(8) . . ?
O21 Si1 O28 99.9(8) . . ?
O20 Si1 O28 105.9(8) . . ?
O21 Si1 O19 112.2(9) . . ?
O20 Si1 O19 116.2(7) . . ?
O28 Si1 O19 111.7(7) . . ?
O65 Si2 O58 104.8(8) . . ?
O65 Si2 O57 106.8(8) . . ?
O58 Si2 O57 111.1(8) . . ?
O65 Si2 O56 97.7(8) . . ?
O58 Si2 O56 116.8(7) . . ?
O57 Si2 O56 117.2(7) . . ?
O17 P1 O35 107.1(11) . . ?
O17 P1 O2 102.5(9) . . ?
O35 P1 O2 115.5(10) . . ?
O17 P1 C1 110.2(11) . . ?
O35 P1 C1 112.8(10) . . ?
O2 P1 C1 108.2(10) . . ?
O36 P2 O6 111.0(10) . . ?
O36 P2 C3 104.1(14) . . ?
O6 P2 C3 105.7(13) . . ?
O36 P2 O8 119.6(10) . . ?
O6 P2 O8 111.2(10) . . ?
C3 P2 O8 103.9(14) . . ?
O15 P3 O37 103.3(10) . . ?
O15 P3 O12 106.4(9) . . ?
O37 P3 O12 125.9(10) . . ?
O15 P3 C5 113.1(11) . . ?
O37 P3 C5 108.3(11) . . ?
O12 P3 C5 100.1(10) . . ?
O41 P4 O38 114.1(10) . . ?
O41 P4 O72 109.9(10) . . ?
O38 P4 O72 111.7(10) . . ?
O41 P4 C7 97.9(11) . . ?
O38 P4 C7 96.8(11) . . ?
O72 P4 C7 125.7(13) . . ?
O73 P5 O47 109.7(12) . . ?
O73 P5 O45 102.3(12) . . ?
O47 P5 O45 118.4(10) . . ?
O73 P5 C9 117.5(13) . . ?
O47 P5 C9 99.8(11) . . ?
O45 P5 C9 110.1(12) . . ?
O74 P6 O51 109.3(12) . . ?
O74 P6 O54 106.7(12) . . ?
O51 P6 O54 119.2(11) . . ?
O74 P6 C11 119.6(13) . . ?
O51 P6 C11 95.6(12) . . ?
O54 P6 C11 107.0(13) . . ?
O3 W1 O4 108.0(8) . . ?
O3 W1 O1 94.7(8) . . ?
O4 W1 O1 157.3(8) . . ?
```

```
O3 W1 O22 103.2(8) . . ?
O4 W1 O22 79.7(8) . . ?
O1 W1 O22 97.2(8) . . ?
O3 W1 O2 90.7(8) . . ?
O4 W1 O2 96.9(7) . . ?
O1 W1 O2 80.7(8) . . ?
O22 W1 O2 166.1(7) . . ?
O3 W1 O19 172.8(7) . . ?
O4 W1 O19 78.0(7) . . ?
O1 W1 O19 79.2(7) . . ?
O22 W1 O19 81.5(7) . . ?
O2 W1 O19 84.6(7) . . ?
O3 W1 W6 129.6(6) . . ?
O4 W1 W6 121.9(6) . . ?
O1 W1 W6 35.4(5) . . ?
O22 W1 W6 92.8(5) . . ?
O2 W1 W6 77.5(5) . . ?
O19 W1 W6 44.0(4) . . ?
O5 W2 O23 92.7(9) . . ?
O5 W2 O6 100.9(9) . . ?
O23 W2 O6 166.3(8) . . ?
O5 W2 O4 96.6(8) . . ?
O23 W2 O4 97.2(7) . . ?
O6 W2 O4 82.1(7) . . ?
O5 W2 O7 104.3(8) . . ?
O23 W2 O7 83.2(7) . . ?
O6 W2 O7 92.6(7) . . ?
O4 W2 O7 159.1(7) . . ?
O5 W2 O21 173.9(7) . . ?
O23 W2 O21 90.4(7) . . ?
O6 W2 O21 75.9(7) . . ?
O4 W2 O21 88.2(6) . . ?
O7 W2 O21 70.9(6) . . ?
O9 W3 O10 97.3(8) . . ?
O9 W3 O24 91.6(9) . . ?
O10 W3 O24 95.1(8) . . ?
O9 W3 O7 104.0(9) . . ?
O10 W3 O7 158.5(8) . . ?
O24 W3 O7 87.5(8) . . ?
O9 W3 O8 103.5(9) . . ?
O10 W3 O8 86.0(8) . . ?
O24 W3 O8 164.7(7) . . ?
O7 W3 O8 86.0(8) . . ?
O9 W3 O21 171.3(9) . . ?
O10 W3 O21 88.5(7) . . ?
O24 W3 O21 94.3(6) . . ?
O7 W3 O21 70.0(7) . . ?
O8 W3 O21 70.4(6) . . ?
O13 W4 O10 156.2(8) . . ?
O13 W4 O11 101.7(8) . . ?
O10 W4 O11 101.9(8) . . ?
O13 W4 O25 93.7(8) . . ?
O10 W4 O25 86.8(8) . . ?
O11 W4 O25 96.6(8) . . ?
O13 W4 O12 80.9(8) . . ?
O10 W4 O12 92.0(8) . . ?
O11 W4 O12 99.5(8) . . ?
O25 W4 O12 163.8(7) . . ?
O13 W4 O20 74.1(7) . . ?
O10 W4 O20 82.2(7) . . ?
O11 W4 O20 172.6(7) . . ?
O25 W4 O20 89.9(6) . . ?
O12 W4 O20 74.0(6) . . ?
O14 W5 O26 103.4(9) . . ?
O14 W5 O15 91.6(8) . . ?
O26 W5 O15 165.0(7) . . ?
```

```
O14 W5 O20 171.1(8) . . ?
O26 W5 O20 82.3(7) . . ?
O15 W5 O20 82.7(7) . . ?
O14 W5 O16 99.7(8) . . ?
O26 W5 O16 92.9(7) . . ?
O15 W5 O16 85.8(7) . . ?
O20 W5 O16 86.7(6) . . ?
O14 W5 O13 97.3(9) . . ?
O26 W5 O13 85.9(7) . . ?
O15 W5 O13 91.0(7) . . ?
O20 W5 O13 76.1(7) . . ?
O16 W5 O13 162.7(7) . . ?
O18 W6 O1 94.0(8) . . ?
O18 W6 O16 106.4(7) . . ?
O1 W6 O16 159.5(7) . . ?
O18 W6 O27 107.3(8) . . ?
O1 W6 O27 91.5(7) . . ?
O16 W6 O27 83.7(7) . . ?
O18 W6 O17 85.7(8) . . ?
O1 W6 O17 83.8(7) . . ?
O16 W6 O17 96.3(7) . . ?
O27 W6 O17 166.5(7) . . ?
O18 W6 O19 172.8(8) . . ?
O1 W6 O19 79.5(7) . . ?
O16 W6 O19 80.0(6) . . ?
O27 W6 O19 76.2(7) . . ?
O17 W6 O19 90.5(7) . . ?
O18 W6 W1 125.4(6) . . ?
O1 W6 W1 31.7(5) . . ?
O16 W6 W1 127.8(5) . . ?
O27 W6 W1 86.4(5) . . ?
O17 W6 W1 83.0(5) . . ?
O19 W6 W1 47.9(4) . . ?
O29 W7 O34 101.1(9) . . ?
O29 W7 O23 101.0(9) . . ?
O34 W7 O23 157.4(7) . . ?
O29 W7 O22 101.1(9) . . ?
O34 W7 O22 89.8(8) . . ?
O23 W7 O22 81.1(8) . . ?
O29 W7 O30 98.7(9) . . ?
O34 W7 O30 90.8(8) . . ?
O23 W7 O30 90.7(8) . . ?
O22 W7 O30 159.7(6) . . ?
O29 W7 O28 171.0(9) . . ?
O34 W7 O28 75.1(7) . . ?
O23 W7 O28 83.7(7) . . ?
O22 W7 O28 87.1(6) . . ?
O30 W7 O28 73.4(6) . . ?
O29 W7 W9 132.4(7) . . ?
O34 W7 W9 32.2(5) . . ?
O23 W7 W9 126.6(5) . . ?
O22 W7 W9 90.2(5) . . ?
O30 W7 W9 79.7(5) . . ?
O28 W7 W9 43.1(4) . . ?
O32 W8 O24 155.0(8) . . ?
O32 W8 O31 101.9(9) . . ?
O24 W8 O31 103.0(8) . . ?
O32 W8 O30 87.2(8) . . ?
O24 W8 O30 90.0(8) . . ?
O31 W8 O30 101.5(8) . . ?
O32 W8 O25 91.0(8) . . ?
O24 W8 O25 81.5(7) . . ?
O31 W8 O25 102.5(8) . . ?
O30 W8 O25 155.8(8) . . ?
O33 W9 O34 96.5(9) . . ?
O33 W9 O26 104.0(9) . . ?
```

```
O34 W9 O26 159.0(8) . . ?
O33 W9 O28 169.1(8) . . ?
O34 W9 O28 76.2(7) . . ?
O26 W9 O28 83.9(7) . . ?
O33 W9 O27 102.4(9) . . ?
O34 W9 O27 87.1(7) . . ?
O26 W9 O27 84.6(7) . . ?
O28 W9 O27 85.5(7) . . ?
O33 W9 O32 96.7(9) . . ?
O34 W9 O32 93.2(7) . . ?
O26 W9 O32 88.4(7) . . ?
O28 W9 O32 75.9(7) . . ?
O27 W9 O32 160.7(7) . . ?
O33 W9 W7 124.2(7) . . ?
O34 W9 W7 28.4(5) . . ?
O26 W9 W7 131.6(5) . . ?
O28 W9 W7 47.9(4) . . ?
O27 W9 W7 87.4(5) . . ?
O32 W9 W7 83.8(5) . . ?
O59 W10 O39 99.1(8) . . ?
O59 W10 O38 162.5(7) . . ?
O39 W10 O38 98.3(8) . . ?
O59 W10 O40 92.1(7) . . ?
O39 W10 O40 94.7(8) . . ?
O38 W10 O40 84.9(8) . . ?
O59 W10 O55 87.6(7) . . ?
O39 W10 O55 106.5(7) . . ?
O38 W10 O55 89.0(7) . . ?
O40 W10 O55 158.7(7) . . ?
O59 W10 O56 85.4(7) . . ?
O39 W10 O56 173.6(6) . . ?
O38 W10 O56 77.1(6) . . ?
O40 W10 O56 80.6(6) . . ?
O55 W10 O56 78.1(6) . . ?
O60 W11 O42 101.3(9) . . ?
O60 W11 O41 161.5(8) . . ?
O42 W11 O41 97.1(8) . . ?
O60 W11 O40 90.2(8) . . ?
O42 W11 O40 94.3(8) . . ?
O41 W11 O40 86.8(7) . . ?
O60 W11 O43 88.3(8) . . ?
O42 W11 O43 106.0(7) . . ?
O41 W11 O43 88.1(7) . . ?
O40 W11 O43 159.5(7) . . ?
O60 W11 O56 83.2(7) . . ?
O42 W11 O56 172.7(7) . . ?
O41 W11 O56 78.3(6) . . ?
O40 W11 O56 79.8(6) . . ?
O43 W11 O56 79.8(6) . . ?
O44 W12 O61 99.6(9) . . ?
O44 W12 O45 96.2(8) . . ?
O61 W12 O45 163.8(7) . . ?
O44 W12 O43 97.9(7) . . ?
O61 W12 O43 80.1(8) . . ?
O45 W12 O43 101.3(7) . . ?
O44 W12 O46 102.0(7) . . ?
O61 W12 O46 98.4(8) . . ?
O45 W12 O46 74.6(7) . . ?
O43 W12 O46 160.0(6) . . ?
O44 W12 O57 173.0(8) . . ?
O61 W12 O57 84.0(7) . . ?
O45 W12 O57 79.8(7) . . ?
O43 W12 O57 88.5(6) . . ?
O46 W12 O57 71.5(6) . . ?
O48 W13 O47 89.9(9) . . ?
O48 W13 O62 107.9(8) . . ?
```

```
O47 W13 O62 162.2(7) . . ?
O48 W13 O49 96.9(8) . . ?
O47 W13 O49 91.4(7) . . ?
O62 W13 O49 87.7(7) . . ?
O48 W13 O46 104.2(8) . . ?
O47 W13 O46 86.6(8) . . ?
O62 W13 O46 87.8(7) . . ?
O49 W13 O46 158.8(7) . . ?
O48 W13 O57 173.6(7) . . ?
O47 W13 O57 86.5(7) . . ?
O62 W13 O57 75.7(6) . . ?
O49 W13 O57 88.5(6) . . ?
O46 W13 O57 70.4(6) . . ?
O63 W14 O51 162.6(8) . . ?
O63 W14 O50 109.0(8) . . ?
O51 W14 O50 88.1(9) . . ?
O63 W14 O49 90.2(7) . . ?
O51 W14 O49 91.0(8) . . ?
O50 W14 O49 97.2(8) . . ?
O63 W14 O52 85.5(8) . . ?
O51 W14 O52 87.3(8) . . ?
O50 W14 O52 103.3(8) . . ?
O49 W14 O52 159.4(7) . . ?
O63 W14 O58 75.6(6) . . ?
O51 W14 O58 87.1(7) . . ?
O50 W14 O58 172.6(7) . . ?
O49 W14 O58 88.5(6) . . ?
O52 W14 O58 70.9(6) . . ?
O53 W15 O64 96.6(9) . . ?
O53 W15 O54 97.2(9) . . ?
O64 W15 O54 166.1(7) . . ?
O53 W15 O55 98.2(8) . . ?
O64 W15 O55 80.6(8) . . ?
O54 W15 O55 98.9(7) . . ?
O53 W15 O52 102.0(8) . . ?
O64 W15 O52 99.5(8) . . ?
O54 W15 O52 76.1(8) . . ?
O55 W15 O52 159.6(6) . . ?
O53 W15 O58 173.8(8) . . ?
O64 W15 O58 87.6(7) . . ?
O54 W15 O58 78.5(7) . . ?
O55 W15 O58 87.0(6) . . ?
O52 W15 O58 72.6(6) . . ?
O66 W16 O59 91.7(9) . . ?
O66 W16 O67 100.3(9) . . ?
O59 W16 O67 83.6(7) . . ?
O66 W16 O64 100.3(9) . . ?
O59 W16 O64 94.2(7) . . ?
O67 W16 O64 159.3(8) . . ?
O66 W16 O71 111.8(9) . . ?
O59 W16 O71 156.1(8) . . ?
O67 W16 O71 95.8(7) . . ?
O64 W16 O71 78.0(8) . . ?
O66 W16 O65 172.8(8) . . ?
O59 W16 O65 93.6(6) . . ?
O67 W16 O65 75.5(7) . . ?
O64 W16 O65 84.2(7) . . ?
O71 W16 O65 63.4(7) . . ?
O68 W17 O60 91.2(9) . . ?
O68 W17 O61 101.8(9) . . ?
O60 W17 O61 92.7(8) . . ?
O68 W17 O67 99.3(9) . . ?
O60 W17 O67 85.0(7) . . ?
O61 W17 O67 158.8(8) . . ?
O68 W17 O69 110.4(9) . . ?
O60 W17 O69 158.1(8) . . ?
```

```
O61 W17 O69 79.6(7) . . ?
O67 W17 O69 94.8(7) . . ?
O68 W17 O65 172.4(8) . . ?
O60 W17 O65 94.5(7) . . ?
O61 W17 O65 83.0(7) . . ?
O67 W17 O65 76.2(7) . . ?
O69 W17 O65 64.4(7) . . ?
O70 W18 O63 92.8(9) . . ?
O70 W18 O62 92.9(8) . . ?
O63 W18 O62 84.6(7) . . ?
O70 W18 O71 105.0(9) . . ?
O63 W18 O71 92.7(8) . . ?
O62 W18 O71 162.0(7) . . ?
O70 W18 O69 104.3(9) . . ?
O63 W18 O69 162.8(7) . . ?
O62 W18 O69 92.4(7) . . ?
O71 W18 O69 84.9(8) . . ?
O70 W18 O65 168.8(9) . . ?
O63 W18 O65 95.9(6) . . ?
O62 W18 O65 94.8(6) . . ?
O71 W18 O65 67.7(7) . . ?
O69 W18 O65 67.3(7) . . ?
C110 N7 C109 120(3) . . ?
C110 N7 C111 121(3) . . ?
C109 N7 C111 119(3) . . ?
O75 C111 N7 113(7) . . ?
C112 N8 C114 123(3) . . ?
C112 N8 C113 119(3) . . ?
C114 N8 C113 117(3) . . ?
O76 C112 N8 116(5) . . ?
C116 N9 C115 124(3) . . ?
C116 N9 C117 119(3) . . ?
C115 N9 C117 117(3) . . ?
O77 C115 N9 133(8) . . ?

_diffrn_measured_fraction_theta_max    0.645
_diffrn_reflns_theta_full              66.81
_diffrn_measured_fraction_theta_full   0.645
_refine_diff_density_max    2.284
_refine_diff_density_min   -2.761
_refine_diff_density_rms    0.350
```